



HAL
open science

Z-set/ZeBuLoN : une suite logicielle pour la mécanique des matériaux et le calcul de structures

Djamel Missoum-Benziane, Vincent Chiaruttini, Jean-Didier Garaud, Frédéric Feyel, Ron Foerch, Nikolay Osipov, Stéphane Quilici, Johann Rannou, Arjen Roos, David Ryckelynck

► **To cite this version:**

Djamel Missoum-Benziane, Vincent Chiaruttini, Jean-Didier Garaud, Frédéric Feyel, Ron Foerch, et al.. Z-set/ZeBuLoN : une suite logicielle pour la mécanique des matériaux et le calcul de structures. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. 8 p. hal-00592920

HAL Id: hal-00592920

<https://hal.science/hal-00592920>

Submitted on 3 May 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Z-set/ZéBuLoN : une suite logicielle pour la mécanique des matériaux et le calcul de structures

D. Missoum-Benziane¹, V. Chiaruttini², J.D. Garaud², F. Feyel², R. Foerch³, N. Osipov¹, S. Quilici¹, J. Rannou², A. Roos², D. Ryckelynck¹

¹ MINES ParisTech, Centre des matériaux, CNRS UMR 7633, Evry, France, {nikolay.osipov,stephane.quilici}@ensmp.fr

² Onera DMSM/CEMN, Châtillon, France, {vincent.chiaruttini,jean-didier.garaud,frederic.feyel,johann.rannou}@onera.fr

³ NW Numerics, Coventry, RI, USA info@nwnumerics.com

Résumé — La suite Z-set/ZéBuLoN est un ensemble d'outils dédiés à la mécanique des matériaux et au calcul de structures co-développés par l'Onera, le Centre des Matériaux (Mines ParisTech) et par la société NW Numerics. Elle intègre différents modules tels qu'un solveur éléments finis, une bibliothèque d'intégration de loi matériaux, un optimiseur permettant de déterminer les paramètres matériaux d'une loi à partir de données d'essais. Certains de ces modules sont indépendants et peuvent être utilisés par des codes commerciaux (Abaqus, Ansys, Samcef, ...) sous la forme de plugins. Des développements récents ont été faits dans les domaines de la mécanique de la rupture et du calcul haute performance et multimodèle.

Mots clés — éléments finis, lois de comportement, calcul parallèle, fissuration, couplage de codes

1 La suite Z-set

La suite logicielle Z-set est un ensemble d'outils dédiés à la mécanique des matériaux et au calcul de structures sous sollicitations thermo-mécaniques complexes. Elle est conjointement développée par le Centre des Matériaux (Mines ParisTech), par l'Onera et par la société NW Numerics en poursuivant un double objectif :

- capitaliser la recherche réalisée dans ces trois entités, tant dans les domaines des modèles matériaux que du calcul de structures et des méthodes numériques associées
- fournir aux utilisateurs, industriels et académiques, un outil de simulation robuste et pérenne

Développée à l'origine pour les besoins des mécaniciens des matériaux, la composante « lois de comportement » demeure un élément essentiel de la suite logicielle et est disponible à travers son module Z-mat qui fournit une large bibliothèque de comportements matériaux ainsi qu'un langage de haut niveau (ZebFront) pour la définition de nouvelles lois de comportement. Z-mat s'intègre naturellement au solveur éléments finis ZéBuLoN mais est également utilisable sous la forme de plugin dans d'autres codes éléments finis (Abaqus Standard/Explicit, Ansys, Samcef, ...). Z-mat est complété par le module Z-simopt, un outil d'aide à l'identification de paramètres de lois de comportement à partir de données d'essais.

À travers le solveur éléments finis ZéBuLoN, de nombreuses fonctionnalités avancées en calcul de structure sont également fournies. Dans ce document, nous présentons principalement deux aspects :

- les outils de remaillage et de propagation de fissures
- les fonctionnalités de calcul multimodèle : réduction de modèles et couplage de code

La suite Z-set peut être utilisée gratuitement dans un contexte académique. Il est à noter par ailleurs que de nombreuses collaborations avec des laboratoires extérieurs ont fait l'objet de développements intégrés, soit dans le noyau du code, soit sous la forme de plugins [1].

2 Lois de comportement

Z-mat - bibliothèque de lois de comportement

Z-mat est le module de définition des comportements du code ZéBuLoN. Il regroupe un module d'intégration de lois de comportement et une bibliothèque de comportements comprenant entre autres l'élasto-visco-plasticité, l'endommagement et les modèles multiéchelles.

La bibliothèque existante comprend plus de 100 000 lignes de code en C++ de modèles matériau. Les modèles sont modulaires ce qui permet à l'utilisateur une utilisation souple en combinant différentes *briques matériau* (types d'élasticité, critères de plasticité, lois d'écoulement, types d'écrouissage, etc...) pour construire un nouveau modèle de façon dynamique. Toutes les combinaisons sont possibles pour décrire le comportement de métaux, polymères, cristaux, inélasticité poreuse, de la mécanique des milieux continus, des sols et des matériaux anisotropes.

De plus, l'utilisateur peut définir son propre comportement, soit en intégrant de *nouvelles briques* dans les classes existantes, soit en décrivant les équations régissant ce comportement à l'aide du langage de haut niveau *ZebFront*, l'intégration étant ensuite réalisée par Z-mat. Z-mat possède également des interfaces avec des logiciels éléments finis du commerce tels que Abaqus, Ansys ou Samcef.

Outils de simulation et d'optimisation

Au sein de la suite Z-set, le module matériau est interfacé avec des outils efficaces de simulation de comportement et des méthodes d'optimisation pour une calibration automatique des paramètres de loi de comportement :

Z-sim permet la simulation rapide de la réponse des lois comportement disponibles dans Z-mat sous un chargement décrit directement en terme de contraintes et de déformations au lieu de forces et de déplacements. Le code s'exécute beaucoup plus rapidement qu'un calcul éléments finis équivalent sur un seul élément, et permet des chargements mixtes complexes. La simulation peut être pilotée directement à partir d'un fichier contenant les mesures expérimentales. D'autres fonctionnalités sont prévues pour tracer la surface de charge ou d'endommagement dans l'espace des contraintes, à différents moments de chargement.

Z-opt est un logiciel d'optimisation d'usage général qui peut être interfacé avec n'importe quel logiciel acceptant à l'entrée des fichiers ASCII. Toutefois, étant donné que Z-opt est conçu principalement pour répondre à la problématique de calibration des paramètres de la loi de comportement, les paramètres optimaux sont généralement définis comme minimisant la distance au carré entre un ensemble de courbes de référence (données expérimentales) et les courbes simulées par le logiciel externe. La figure 1 montre le principe d'optimisation utilisé pour calibrer les paramètres d'une loi de comportement.

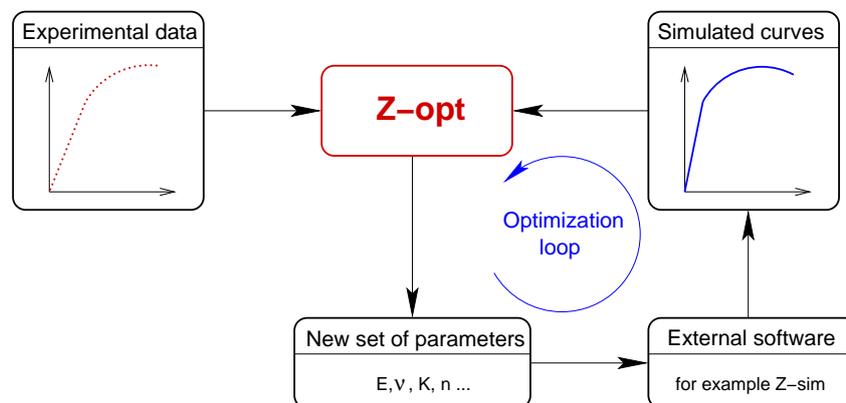


FIG. 1 – Principe d'optimisation dans Z-set

Interface graphique SimOpt

Une interface utilisateur graphique (Fig. 2) permet de piloter les modules de simulation (Z-sim) et d'optimisation (Z-opt). Les capacités interactives offertes par cette interface sont très utiles pour la mise en place et la réalisation d'un projet d'identification des coefficients d'une loi de comportement.

L'interface permet à l'utilisateur de :

- gérer des variables de la loi de comportement
- charger les résultats expérimentaux (sous forme de courbes), les filtrer et les tracer
- mettre en place l'ensemble des simulations nécessaires à l'optimisation
- gérer les simulations extérieures
- définir et mettre en place des optimisations
- analyser l'évolution de variables en anisotherme
- de tracer les résultats en forme de courbes
- sauvegarder les résultats d'optimisation.

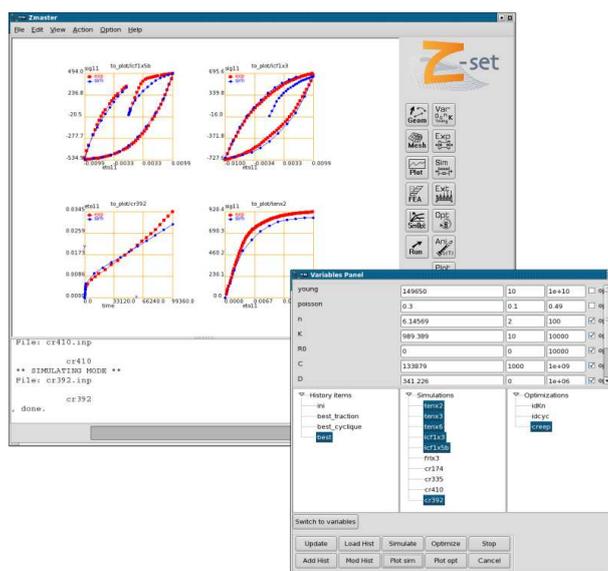


FIG. 2 – Interface graphique SimOpt

3 Outils de remaillage et de propagation de fissures

La problématique de la propagation de fissures est présente chez de nombreux industriels et les méthodes numériques associées font l'objet de très nombreuses recherches. Au cours de ces dix dernières années, d'importants progrès ont été réalisés. En premier lieu, la méthode des éléments finis étendus a été considérablement développée et a été suivie, dans un second temps, d'une évolution très rapide des méthodes de remaillage. Ces deux grandes classes de méthodes sont mises en œuvre dans le module Z-crack du solveur ZéBuLoN dans un cadre thermo-mécanique linéaire.

Éléments finis étendus

La mise en œuvre de la méthode des éléments finis étendus dans ZéBuLoN respecte les formalismes suivants : (i) un enrichissement topologique ou géométrique, (ii) une description et une évolution de la géométrie de la fissure par fonctions de niveaux sur grille différences finies auxiliaire. Un remaillage de la zone à enrichir peut également être réalisé dans la région fissurée lorsque le modèle initial est trop grossier. Ce remaillage peut intervenir en cours de propagation.

Une interface graphique dédiée permet, à partir de la mise en donnée d'un problème non fissuré, d'insérer une fissure de forme prédéterminée (plane, elliptique) et de gérer les paramètres de remaillage, de cyclage du calcul et d'un éventuel zoom structural (voir Figure 3). Pour des mises en données plus complexes, le recours à l'interface classique de ZéBuLoN, plus flexible, est possible.

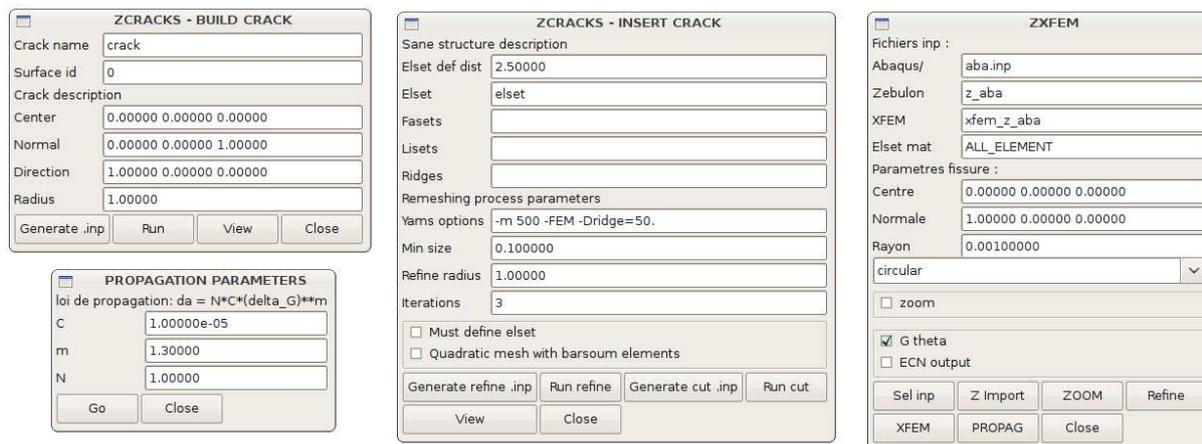


FIG. 3 – Interface graphique pour la mise en donnée X-FEM ou par remaillage.

Remaillage conforme

Les derniers développements des mailleurs ont permis de relancer les techniques par remaillage pour la propagation de fissure. Cette approche a également été adoptée dans ZéBuLoN et s'appuie sur les outils de maillage développés par l'INRIA et Distene [2]. Lors d'une première étape, le maillage résultant de l'intersection du maillage volumique préexistant et d'un maillage surfacique représentant une fissure est généré. Dans un second temps, le nouveau maillage volumique est adapté afin d'obtenir une discrétisation de qualité suffisante pour le calcul de structure fissurée. Une interface graphique est également disponible pour faciliter la mise en données (voir Figure 3).

Cette approche par remaillage conforme s'est révélée être très robuste. De plus, le formalisme éléments finis classique étant préservé, certaines fonctionnalités telles que la prise en compte du contact sont directement utilisables.

Exemples de propagation en fatigue

Dans cet exemple, les deux approches ont été appliquées sur un cas de propagation de fissure de fatigue [3]. Il s'agit d'une pièce de rotor de turbomachine (chargement centrifuge) qui présente une fissure circulaire débouchant en bord de perçage. Si les méthodes de calcul de structure et de propagation de géométrie diffèrent, le post-traitement des facteurs d'intensité des contraintes par une intégrale d'interaction est commun.

La figure 4.a illustre les facteurs d'intensité des contraintes obtenus avant propagation avec X-FEM et maillage conforme (éléments linéaires ou quadratiques). Sur la figure 4.b, les géométries de la fissure à même nombre de cycle sont représentées. Le remaillage en cours de propagation peut être visualisé sur la figure 5.

4 Calcul multimodèle

Modèles multiphysiques et couplage de codes

Avec l'augmentation des performances des calculateurs récents, la simulation de problèmes multiphysiques connaît un essor considérable : des modèles réalisés auparavant de manière découplée pour des raisons de coût calcul deviennent maintenant accessibles. Outre les classiques interactions aéromécaniques (couplant une structure à un gaz ou un liquide s'écoulant autour d'elle), et aéro-thermiques (couplant la conduction dans une structure avec un écoulement de fluide), le terme *multiphysique* recouvre aussi des domaines plus originaux tels que les interactions entre phénomènes micro-structuraux et thermiques, ou entre rayonnement, combustion et conduction.

Les physiques, prises indépendamment sont de mieux en mieux comprises et simulées ; tout l'enjeu consiste à les faire interagir. Pour cela, les techniques de « couplage partitionné » [4] sont les mieux adaptées : en séparant l'écriture des équations de chaque physique et en intégrant les interactions comme

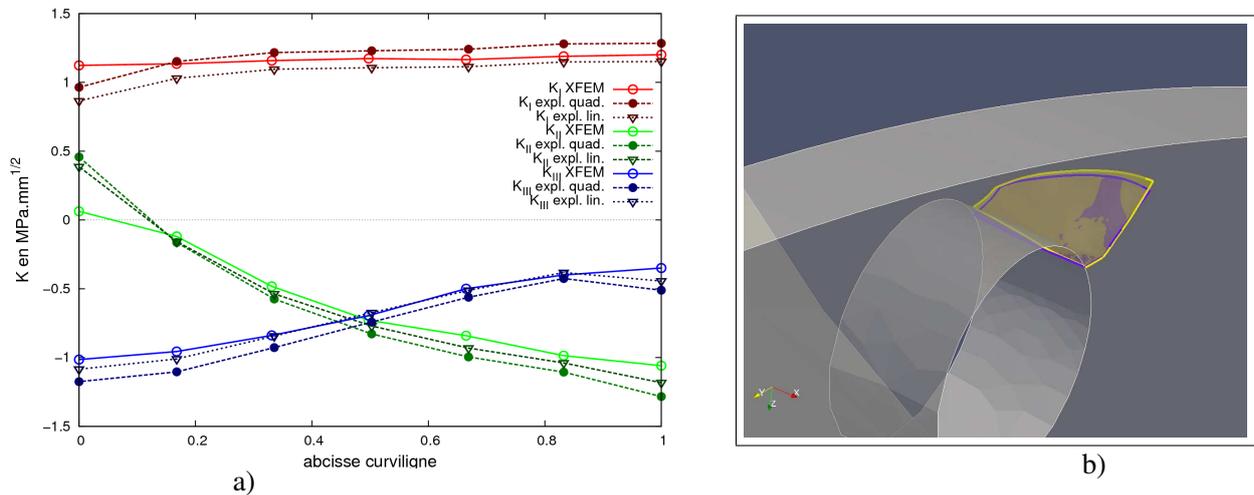


FIG. 4 – Facteurs d’intensité des contraintes avant propagation post-traités à partir d’un calcul X-FEM, FEM avec éléments linéaires ou quadratiques/Barsoum. b) Fissure en cours de propagation (jaune : X-FEM, violet : conforme).

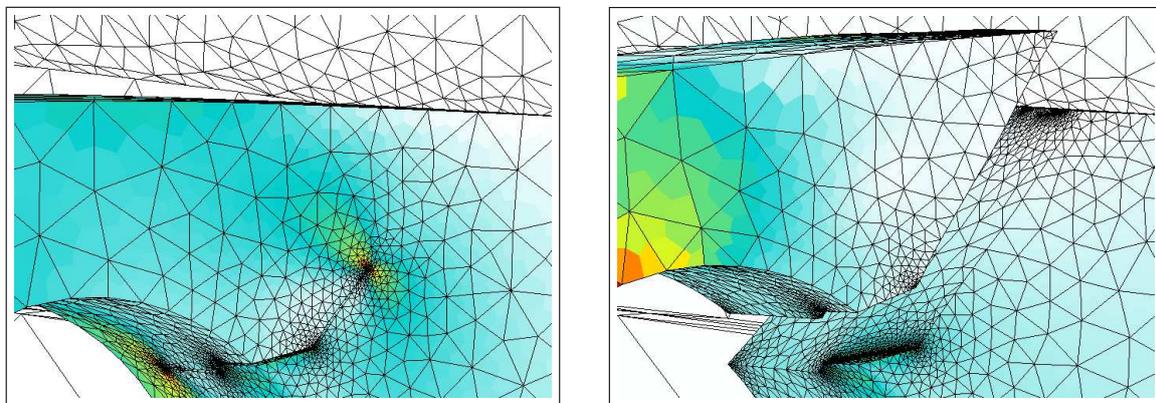


FIG. 5 – a) Contraintes de Von Mises pour deux états de fissuration. Visualisation de la discrétisation dans le cas d’une propagation par maillage conforme.

conditions au bord ou termes sources, il est possible de réutiliser des codes existant pour réaliser la simulation couplée. C’est cette solution qui est présentée dans cet article.

L’expérience montre qu’il n’existe pas d’algorithme de couplage universel permettant d’attaquer toutes les simulations couplées. Au contraire, chaque application nécessite une méthodologie de couplage sur mesure, adaptée à ses spécificités.

Un certain nombre de briques élémentaires sont donc proposées dans ZéBuLoN pour réaliser le couplage :

- la *publication* de champs à l’interface : champs primaux (déplacement, température), champs duaux (contraintes, flux), ou champs dérivés (pression normale ou coefficient de Fourier)
- la *réception* et l’*application* de champs reçus : flux, température, pression, etc. . .
- l’*algorithmie* du couplage : prédictions, corrections, méthodes de recherche de points fixes, etc. . .

L’utilisateur final a alors la charge de choisir les briques les mieux adaptées à son problème. Idéalement, ce choix se fait uniquement sur des critères de physique (en particulier la nature forte ou faible des interactions), mais en pratique, il se fera aussi pour des questions de coût de calcul, ou de disponibilité de certaines fonctionnalités dans les codes en vis-à-vis.

La conception objet de ZéBuLoN permet de réaliser le couplage de manière entièrement non-intrusive, par plugin. De nombreuses applications ont été réalisées en suivant ce modèle : en aéro-thermique, en aéro-mécanique, en aéro-thermo-mécanique ou encore en conduction-rayonnement (Fig 6).

L’approche objet utilisée dans ZéBuLoN permet l’utilisation, et si nécessaire le développement, de stratégies particulières adaptées à chaque application. Par exemple, sur une application pour laquelle les interactions thermiques sont fortement couplées [5], l’utilisation de conditions mixtes de couplage ther-

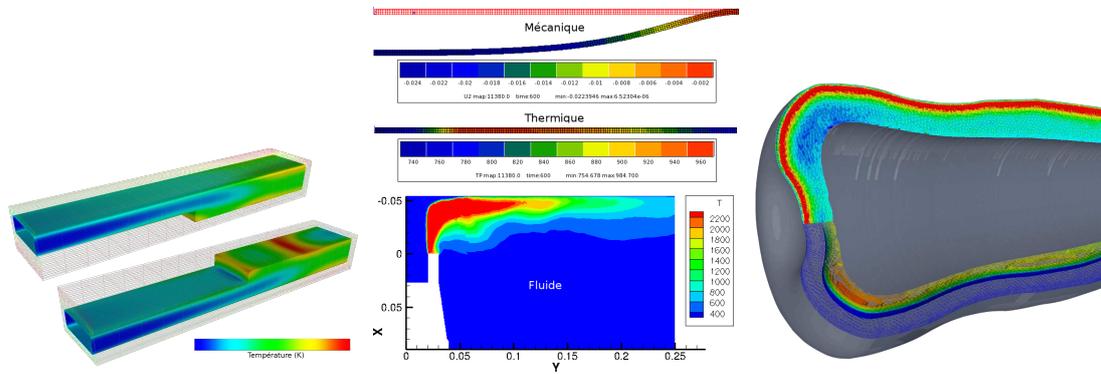


FIG. 6 – Différents calculs couplés : (a) couplage aéro-thermique d’une tuyère MSD-ZéBuLoN [5], (b) couplage aéro-thermo-mécanique d’impact flamme–paroi CEDRE-ZéBuLoN [6] et (c) couplage volumique conduction-rayonnement Astre-ZéBuLoN [7].

mique et de pas de temps de couplage adaptatifs permettent d’améliorer significativement la convergence et le temps de calcul du problème global.

Méthode APHR pour la réduction a priori des modèles non linéaires

En développant la méthode APHR (A Priori Hyper-Reduction), nous cherchons à faciliter les simulations non linéaires pour lesquelles la méthode des éléments finis conduit au calcul d’un très grand nombre d’inconnues (plus de 10 000). La méthode APHR est une méthode de réduction d’ordre de modèle. Nous portons une attention particulière aux calculs des résidus des conditions d’équilibre. Car pour les problèmes où le nombre d’inconnues a été réduit, leur contribution au coût total de la simulation numérique n’est pas négligeable. En mécanique, ce coût est lié à l’intégration de la loi de comportement.

Nous proposons une méthode de réduction a priori [8] qui offre la possibilité de réaliser des simulations à précision maîtrisée ou des simulations à nombre d’inconnues maîtrisées, pour un très grand nombre de problèmes non linéaires, en ne modifiant que de quelques lignes de commande la description informatique du problème à traiter.

La méthode est dite a priori car, du fait d’un algorithme adaptatif, il est possible de commencer une simulation sans base réduite connue. L’approximation en base réduite est construite au cours de la simulation. Elle est adaptée si la précision requise n’est pas atteinte. Au cours de chaque simulation, un domaine réduit pour l’intégration des équations locales est actualisé afin de tenir compte, le cas échéant, de l’adaptation de l’approximation en base réduite. La construction et l’exploitation de ce domaine d’intégration réduit relèvent de la méthode d’Hyper-Réduction [8]. La méthode APHR peut être vue dans certains cas comme une méthode alternative aux méthodes de calcul parallèle [9], ou comme une méthode complémentaire des méthodes de calcul parallèle [10]. Grâce à la méthode d’Hyper-Réduction incluse dans la méthode APHR, nous réduisons à la fois le nombre d’inconnues primales et le nombre d’inconnues locales de type variables internes [11].

Cette méthode a récemment été étendue aux structures hétérogènes dans le cadre de la thèse de Vivien Courtier. Un exemple de modes empiriques associés au champ de déplacement pour une structure hétérogène est montré sur la Figure 7. L’efficacité de la méthode pour la résolution de problèmes paramétriques multidimensionnels a été montrée dans le cadre de la thèse de Florence Vincent et dans [12]. La méthode est également efficace lors du traitement de suites de simulations comme dans le cas de la résolution de problèmes d’optimisation (Thèse en cours de Sophie Cartel). Ces développements ont été financés par Arts et Métiers ParisTech, le CNRS, Mines ParisTech, Armines, l’ANR (projets MELOXEL, CALM, EHPOC, CSDL) et SAFRAN. On peut souligner que les travaux de l’ONERA sur le remaillage ont facilité la mise en œuvre de la méthode APHR dans ZéBuLoN en offrant une architecture logicielle compatible avec l’adaptation d’approximations en cours de simulation.

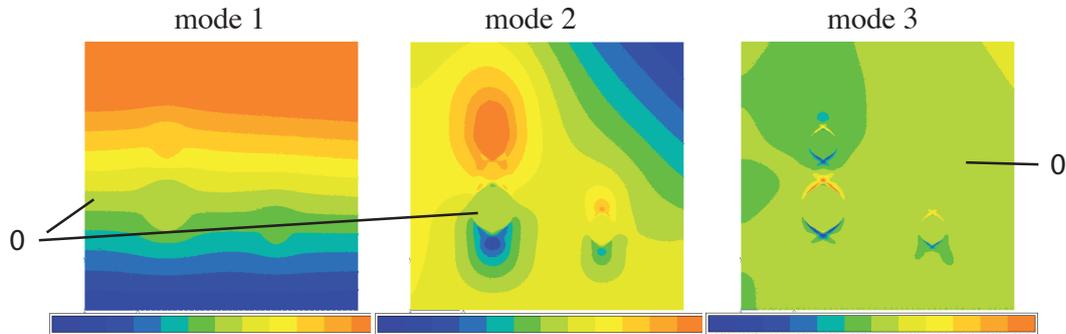


FIG. 7 – Modes empiriques de déplacements verticaux pour une structure hétérogène.

5 Conclusion

La suite logicielle Z-set comporte de nombreux modules dédiés à la simulation des matériaux et structures. Le module matériau fournit d'une part une base riche de comportements pour les matériaux métalliques (modèles thermo-visco-plastiques, plasticité cristalline, . . .), pour les matériaux composites (endommagement, critères de rupture) ou encore pour les polymères. D'autre part, il facilite aussi le développement et l'intégration de nouvelles lois de comportement et peut être relié à certains autres codes de calcul de structures.

Un solveur éléments finis accompagne le module matériau pour fournir une solution complète de simulation en mécanique des structures. Modulaire, ce solveur bénéficie de fonctionnalités récentes en calcul intensif : solveurs linéaires parallèles directs ou itératifs, méthodes de réduction de modèles, interopérabilité avec d'autres solveurs. De nouvelles méthodes originales ont aussi été récemment développées pour la simulation des problèmes de contact ou de fissuration.

Les facilités d'extension du logiciel en font un outil apprécié dans les domaines académiques et industriels pour tester et développer de nouveaux modèles. Au-delà de la contribution des trois co-développeurs principaux (Centre des Matériaux, Onera, NW Numerics), l'ouverture à des partenaires extérieurs permet une extension continue des capacités de la suite Z-set.

Références

- [1] G. Pacquaut, J. Bruchon, N. Moulin, S. Drapier. *Combining a level-set method and mixed stabilized P1/P1 formulation for coupling stokes-darcy flows*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, accepted.
- [2] Yams et GHS3D : maillages surfaciques et volumiques. <http://www.distene.com/>
- [3] J. Rannou, V. Chiaruttini, F. Feyel, N. Osipov, S. Quilici *X-FEM and explicit crack meshing techniques applied to industrial fracture mechanics problems*, European Congress on Computational Mechanics, Paris, 2010.
- [4] C. A. Felippa, K. C. Park, and C. Farhat, *Partitioned analysis of coupled mechanical systems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 190 :3247-3270, 2001.
- [5] F.-X. Roux and J.-D. Garaud *Domain decomposition methodology with Robin interface matching conditions for solving strongly coupled fluid-structure problems*, International Journal for Multiscale Computational Engineering, 2009.
- [6] B. Baqué, F. Feyel, A. Roos, M.-P. Errera, E. Laroche, D. Donjat, *Couplage aéro-thermo-mécanique pour l'interaction flamme-paroi*, Giens 2011.
- [7] L. H. Dorey, L. Tessé, A. Roos et F. Feyel, *Modélisation et simulation numérique des transferts conductif et radiatif au cours des procédés de formage du verre*. CIFEM 2010.
- [8] D. Ryckelynck *A priori hyperreduction method : an adaptive approach*, International Journal of Computational Physics, 202 (2005) 346–366.
- [9] D. Ryckelynck, D. Missoum Benziane, A. Musienko, and G. Cailletaud *Toward "green" mechanical simulations in materials science : hyper-reduction of a polycrystal plasticity model*, EJCM, Volume 19, pp. 365-388 (2010).
- [10] D. Ryckelynck, D. Missoum Benziane *Multi-level a priori hyper reduction of mechanical models involving internal variables*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 199, Issues 17-20, pp. 1134-1142, (2010).

- [11] D. Ryckelynck *Hyper-reduction of mechanical models involving internal variables*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 77 (2009) 75-89
- [12] B. Sarbandi, S. Cartel, J. Besson, D. Ryckelynck *Truncated Integration for Simultaneous Simulation of Sintering Using a Separated Representation*, Achives of Computational Methods in Engineering, 17 : 455–463 (2010)